

UNA ALTERNATIVA DE SOLUCIÓN PARA PROBLEMAS ESTACIONARIOS DESCRIPTOS POR ECUACIONES TIPO-SCHRÖDINGER CON POTENCIAL CONVEXO SIMÉTRICO

Silvana P. Flego

Grupo de Investigación Teórica y Aplicada en Teoría de la Información (GTyATI).
 Área Departamental de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería,
 Universidad Nacional de La Plata (UNLP).
 (1900) La Plata, Buenos Aires, Argentina.
flego@fisica.unlp.edu.ar

Resumen

Recientemente fue utilizado el teorema del virial para derivar funciones ansatz, libres de parámetros, para las autofunciones asociadas a la ecuación de Schrödinger cuando el potencial interviniente es convexo simétrico. El procedimiento fue testeado con éxito para tratar con el oscilador armónico (HO) y con el oscilador anarmónico cuartico (AHO). Los exitosos resultados obtenidos indican que se dispone de una nueva y poderosa herramienta para tratar con una amplia familia de potenciales. En esta comunicación se presentan los lineamientos generales del procedimiento, los resultados obtenidos al tratar con el HO y con el AHO y se discute la aplicabilidad del tratamiento a situaciones físicas de interés en el ámbito de la ingeniería.

Palabras clave: autofunciones, ecuación de Schrödinger, teorema del virial, oscilador anarmónico.

1. Introducción

Pocos modelos de la mecánica cuántica tienen solución exacta. Por lo general, por potenciales exactamente resolubles se hace referencia a pozos para los que la ecuación de Schrödinger concomitante (SE) se puede reducir a una forma geométrica hipergeométrica o confluyente [1-3] que, aunque bastante elegante, no siempre es fácil de manejar sin alguna sofisticación matemática. Por otra parte, una gran mayoría de los problemas de interés físico no caen en la categoría anterior y se debe recurrir a técnicas de aproximación o cálculo numérico computacional (como un conjunto no exhaustivo ver por ejemplo [4-11]). Desde los años 60, teoremas hiperviriales se han incorporado ventajosamente en el pertinente arsenal [12-13]. Además, el teorema del virial se exploró en el contexto de la teoría de la información, a través de la conexión existente entre la medida de información de Fisher (FIM) y la ecuación de Schrödinger (SE) [14-16]. Tal conexión surge cuando una minimización condicionada de la FIM conduce a una SE [14] y se basa en el hecho de que existe una estructura de Legendre que subyace la SE [15-16]. De un modo bastante insospechado, diversas consecuencias se derivan de dicha estructura. Para el propósito de esta comunicación es de destacar que en [17-18] fue derivada una expresión ansatz [19], libre de parámetros [20], para la función de distribución de probabilidades asociada a potenciales informacionales convexos, de la cual se infiere una expresión ansatz para la función de onda del estado fundamental de su asociada SE. Esta importante expresión puede ser re-derivada en un escenario puramente cuántico [21] y con este "núcleo-ansatz" pueden construirse las autofunciones-ansatz para los estados excitados [21]. El procedimiento fue testeado con éxito para tratar con el oscilador armónico (HO) y con el oscilador anarmónico cuartico (AHO) [21]. En el primer caso, la técnica conduce a las autofunciones exactas del HO. En el caso del AHO, el cual es considerado el terreno de pruebas paradigmático de nuevos enfoques a la SE, los exitosos resultados obtenidos indican que disponemos de una nueva y poderosa herramienta para tratar con potenciales convexos simétricos. En esta comunicación se presentan los lineamientos generales del procedimiento, los resultados obtenidos y se discute la utilidad del tratamiento en el ámbito de la ingeniería.

2. Preliminares

2.1. El escenario cuántico

Consideremos la ecuación de onda de Schrödinger (SE) unidimensional, independiente del tiempo [22], en forma adimensional,

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_x^2 + U(x) \right] \psi_n(x) = E_n \psi_n(x), \quad \nabla_x^2 \equiv \frac{d^2}{dx^2} \quad (1)$$

donde $U(x)$ representan un potencial real, independiente del tiempo. En este escenario, el teorema del virial (TV) establece que [22]

$$\langle -\nabla_x^2 \rangle_n = \langle x U'(x) \rangle_n \quad (2)$$

donde la prima denota derivada respecto del argumento y el valor esperado es evaluado entre estados estacionarios del hamiltoniano. Para escenarios unidimensionales, ψ_n es real [22], y el TV se puede escribir como

$$-\int \psi_n(x) \nabla_x^2 \psi_n(x) dx = \int \psi_n^2(x) x U'(x) dx \quad (3)$$

2.2. Potencial convexo

Los potenciales convexos juegan un papel importante en muchas áreas de la ciencia [23]. Intuitivamente, la gráfica de una función convexa se encuentra sobre cualquier recta tangente a la misma. Para una función de una variable $U(x)$, es útil la siguiente caracterización de convexidad. Si $U(x)$ es una función convexa en I que alcanza su mínimo en $x = \xi \in I$, se cumple que [23]

$$\forall x \in I, \quad (x - \xi) U'(x) \geq 0. \quad (4)$$

3. Tratamiento ansatz para potenciales convexos simétricos

3.1. Autofunción ansatz para el estado fundamental

Sea U un potencial convexo simétrico que alcanza su mínimo en $x = \xi$. Por conveniencia, realizamos una traslación $u = x - \xi$. Denotando con barra a las cantidades referidas al nuevo sistema de referencia \bar{S} , la ecuación de Schrödinger es dada por

$$\bar{H} \bar{\psi}_n(u) = \bar{E} \bar{\psi}_n(u), \quad \text{con} \quad \bar{H} = -\frac{1}{2} \nabla_u^2 + \bar{U}(u), \quad (5)$$

donde el potencial y las funciones propias están relacionados con las originales por

$$\bar{U}(u) = U(u + \xi) = U(x), \quad \bar{\psi}_n(u) = \psi_n(u + \xi) = \psi_n(x) \quad (6)$$

En \bar{S} , el teorema del virial (3) establece que,

$$-\int \bar{\psi}_n(u) \nabla_u^2 \bar{\psi}_n(u) du = \int \bar{\psi}_n^2(u) u \bar{U}'(u) du \quad (7)$$

El primer término de la expresión anterior puede escribirse como

$$\int \bar{\psi}_n \nabla_x^2 \bar{\psi}_n du = -\int (\bar{\psi}_n')^2 du = -\frac{1}{4} \int \bar{\psi}_n^2 \left[\left(\ln \bar{\psi}_n^2 \right)' \right]^2 du \quad (8)$$

así, a partir de (7) y (8) se encuentra la conveniente expresión

$$\int \bar{\psi}_n^2 \left[\left[\left(\ln \bar{\psi}_n^2 \right)' \right]^2 - 4u \bar{U}' \right] du = 0 \quad (9)$$

Sobre la base de que $\bar{U}(u)$ es un potencial convexo simétrico en \bar{S} , se propone una función ψ_a que, por construcción, anula el integrando de (9). Esta condición local conduce a dos soluciones independientes,

$$\bar{\psi}_a^\pm(u) = A \exp\left(\pm \int \sqrt{u \bar{U}'(u)} du\right), \quad (10)$$

donde A es una constante de integración. La transformación $x = u + \xi$ conduce al sistema de referencia original S, y se obtiene

$$\psi_a^\pm(x) = A \exp\left(\pm \int dx \sqrt{(x - \xi) U'(x)}\right), \quad (11)$$

La ec. (11) proporciona una herramienta para construir un ansatz, el cual proporciona buenos resultados para describir la función propia del estado fundamental de la SE (1), como lo muestran los ejemplos examinados en sección 4.

3.2. Las autofunciones ansatz de los estados excitados

Por simplicidad trabajamos en el sistema \bar{S} . Además, para mayor claridad, en este sistema etiquetamos los estados sólo por el índice n. Así, la expresión (10) se escribe como

$$\bar{\psi}_o(u) = N \exp\left(\pm \int du \sqrt{u \bar{U}'(u)}\right) \quad (12)$$

Proponiendo que la función de onda $\bar{\psi}_n$ es proporcional al producto del núcleo-ansatz $\bar{\psi}_o$ y una función desconocida $\bar{\varphi}_n$,

$$\bar{\psi}_n(u) = \bar{\varphi}_n(u) \bar{\psi}_o(u), \quad (13)$$

buscamos una familia de funciones $\{\bar{\varphi}_n\}$ requiriendo que las $\bar{\psi}_n$ verifiquen el teorema del virial y la condición de ortonormalidad.

❖ La condición de ortonormalidad impone que:

$$\int du \bar{\psi}_i(u) \bar{\psi}_j(u) = \int du \bar{\varphi}_i(u) \bar{\varphi}_j(u) \bar{\psi}_o^2(u) = \langle \bar{\varphi}_i \bar{\varphi}_j \rangle_o = \delta_{ij} \quad (14)$$

❖ El valor de expectación del operador de Laplace en el estado n, viene dado por

$$\begin{aligned} \langle \nabla_u^2 \rangle_n &= \int du \bar{\psi}_n \nabla_u^2 \bar{\psi}_n = - \int du (\bar{\psi}_n')^2 = - \int du (\bar{\varphi}_n' \bar{\psi}_o + \bar{\varphi}_n \bar{\psi}_o')^2 = \\ &= - \int du \left[(\bar{\varphi}_n')^2 \bar{\psi}_o^2 + 2 \bar{\varphi}_n \bar{\varphi}_n' \bar{\psi}_o \bar{\psi}_o' + \bar{\varphi}_n^2 (\bar{\psi}_o')^2 \right] \end{aligned} \quad (15)$$

Una integración por partes, seguida de un poco de algebra [21], nos permite escribir la expresión anterior como

$$\langle \nabla_u^2 \rangle_n = \int du \left[(\bar{\varphi}_n \nabla_u^2 \bar{\varphi}_n) \bar{\psi}_o^2 - \bar{\varphi}_n^2 (\bar{\psi}_o')^2 \right] \quad (16)$$

Diferenciando el ansatz (12) tenemos

$$\bar{\psi}_o' = \pm \sqrt{u \bar{U}'} \bar{\psi}_o \quad (17)$$

Sustituyendo (17) en (16) y teniendo en cuenta que $\bar{\psi}_n = \bar{\varphi}_n \bar{\psi}_o$, obtenemos

$$\langle \nabla_u^2 \rangle_n = \int du \left\{ (\bar{\varphi}_n \nabla_u^2 \bar{\varphi}_n) \bar{\psi}_o^2 - (u \bar{U}') \bar{\psi}_n^2 \right\} = \langle \bar{\varphi}_n \nabla_u^2 \bar{\varphi}_n \rangle_o - \langle u \bar{U}' \rangle_n \quad (18)$$

Luego, $\bar{\psi}_n$ satisface el TV (7) si las $\bar{\varphi}_n$ satisfacen la siguiente condición virial

$$\langle \bar{\varphi}_n \nabla_u^2 \bar{\varphi}_n \rangle_o = 0 \quad (19)$$

Las condiciones (14) y (19) sugieren que las funciones $\{\bar{\phi}_n, n=0,1,2,\dots\}$ pueden ser elegidas como una familia de polinomios ortogonales con función de peso $\bar{\psi}_0^2(u)$. Luego, podemos escribir

$$\bar{\phi}_n(u) = \sum_{k=0}^n a_k^{(n)} u^k, \quad (20)$$

y determinar los coeficientes $a_k^{(n)}$ mediante el uso de las condiciones de ortonormalidad (14).

Aunque, en principio, se pueden obtener las expresiones explícitas de $\bar{\phi}_n$ utilizando las condiciones de ortonormalidad (14), la forma explícita de la secuencia $\{\bar{\phi}_n\}$ se puede establecer utilizando el proceso de ortogonalización de Gram-Schmidt [24]. Las formas explícitas de las autofunciones ansatz en \bar{S} son dadas por [21],

$$\bar{\psi}_n(u) = \alpha_n \left[u^n \bar{\psi}_0(u) - \sum_{k=0}^{n-1} \langle \bar{\psi}_k | u^n | \bar{\psi}_0 \rangle \bar{\psi}_k(u) \right], \quad (21)$$

donde

$$\langle \bar{\psi}_k | u^n | \bar{\psi}_0 \rangle \equiv \int u^n \bar{\psi}_k(u) \bar{\psi}_0(u) du$$

y α_n es la correspondiente constante de normalización. Finalmente, la transformación $x = u + \xi$ conduce al sistema de referencia original y las deseadas autofunciones ansatz están dadas por

$$\psi_n^{\text{ansatz}}(x) = \alpha_n \left[(x - \xi)^n \psi_0^{\text{ansatz}}(x) - \sum_{k=0}^{n-1} \langle \psi_k^{\text{ansatz}} | (x - \xi)^n | \psi_0^{\text{ansatz}} \rangle \psi_k^{\text{ansatz}}(x) \right]. \quad (22)$$

3.3. Autovalores de Energía

Una vez que disponemos de autofunciones-ansatz, podemos obtener valores aproximados de las autoenergías. Utilizando el teorema del virial, podemos escribir

$$E_n = \langle \psi_n | H | \psi_n \rangle \approx \langle \psi_n^{\text{ansatz}} | H | \psi_n^{\text{ansatz}} \rangle = \int dx \psi_n^{\text{ansatz}}(x) \left[\frac{1}{2} x U'(x) + U(x) \right] \psi_n^{\text{ansatz}}(x). \quad (23)$$

4. Aplicaciones

4.1. Oscilador armónico trasladado

Para el caso del oscilador armónico, el ansatz construido utilizando la expresión (11), coincide con la correspondiente autofunción del estado fundamental exacto. Luego, los correspondientes polinomios viriales son los conocidos polinomios de Hermite. De esta forma, el tratamiento virial conduce a las funciones propias exactas del oscilador armónico [21].

4.2. Oscilador anarmónico cuártico

La ecuación de Schrödinger para una partícula de masa unidad en un potencial anarmónico cuártico desplazado tiene la forma

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_x^2 + \frac{1}{2} \omega^2 (x - \xi)^2 + \frac{1}{2} \lambda (x - \xi)^4 \right] \psi_n = E_n \psi_n, \quad (24)$$

donde λ es la constante de anarmonicidad. Para el caso en que $\lambda > 0$, la expresión (11) toma la forma

$$\psi_{\pm}^{\text{ansatz}}(x) = A \exp\left(\pm \int \sqrt{\omega^2 (x - \xi)^2 + 2\lambda (x - \xi)^4} dx\right). \quad (25)$$

Luego de una integración elemental e imponiendo la condición que $\psi^a(x) \rightarrow 0$ cuando $x \rightarrow \pm\infty$ y que ψ permanezca finita en el límite en que $\lambda \rightarrow 0$, se obtiene

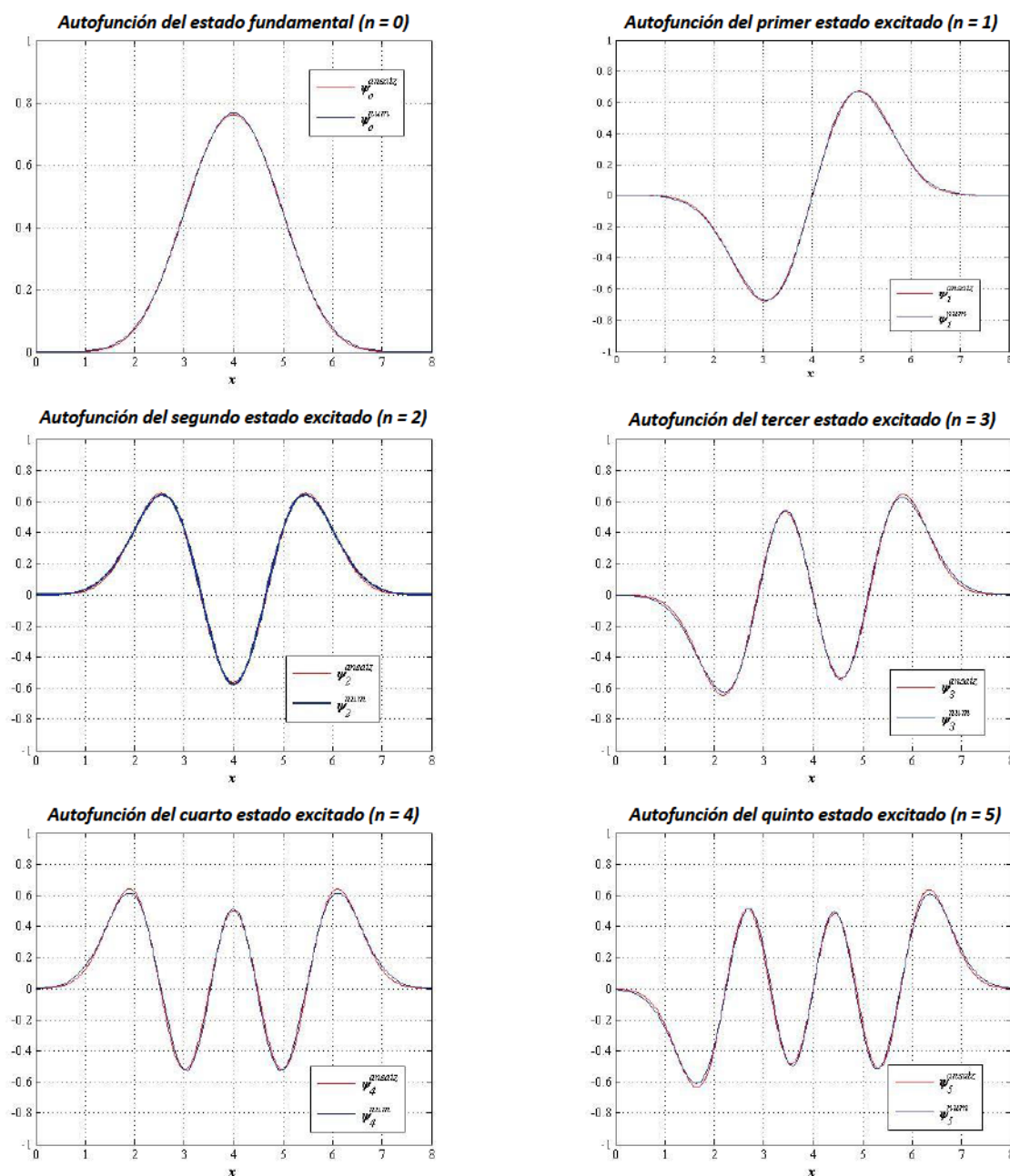
$$\psi_0^{\text{ansatz}}(x) = N \exp\left\{ \frac{\omega^3}{6\lambda} \left[1 - \left(1 + \frac{2\lambda}{\omega^2} (x - \xi)^2 \right)^{3/2} \right] \right\} \quad (26)$$

donde N es la constante de normalización.

Las autofunciones-ansatz para los estados excitados se pueden calcular siguiendo el procedimiento mencionado en la sección 3.3. Las expresiones explícitas, para los primeros cinco autoestados son dadas en [21].

El lector puede juzgar la precisión de los resultados observando las gráficas de las autofunciones obtenidas por cálculo computacional vs. las correspondientes autofunciones-ansatz para $n=0, \dots, 5$. Los resultados corresponden a $\xi=4$, $\omega=1$ y $\lambda=0,1$. Es de destacar que, las características observadas en las presentes gráficas se preservan cuando se varían los valores de los parámetros [21].

Fig. :Autofunciones correspondientes al estado fundamental y los primeros cinco estados excitados del oscilador anarmónico cuántico ($\xi=4$, $\omega=1$, $\lambda=0,1$)



Las autoenergías pueden ser evaluadas a partir de (23), obteniéndose

$$E_n^{ansatz} \equiv \int dx \psi_n^{ansatz}(x) \left[\omega^2 (x - \xi)^2 + \frac{3}{2} \lambda (x - \xi)^4 \right] \psi_n^{ansatz}(x). \quad (27)$$

En la tabla están tabuladas las autoenergías correspondientes al estado fundamental y los primeros cinco estados excitados. En la primera columna se tabula el número cuántico principal n . Los valores de la segunda columna son las correspondientes autoenergías obtenidas por cálculo computacional. En la tercera columna están tabulados los valores obtenidos utilizando la expresión (27). En la cuarta y quinta columnas se muestran, respectivamente, el asociado error relativo ϵ y el correspondiente error relativo porcentual $\epsilon(\%)$.

Autoenergías del oscilador anarmónico cuántico ($\xi = 4$, $\omega = 1$, $\lambda = 0.1$)				
n	E_n^{num}	E_n^{ansatz}	ϵ_n	$\epsilon_n(\%)$
0	0.532642748	0.533053744	0.000771618	0.08
1	1.653436004	1.655044506	0.000972824	0.10
2	2.873979651	2.877939421	0.001377800	0.14
3	4.176338916	4.184146921	0.001869581	0.19
4	5.549297810	5.562349895	0.002352025	0.24
5	6.984963120	7.004564948	0.002806289	0.28

Los resultados obtenidos para diferentes valores de λ están en muy buena concordancia con los exactos [21]. Por supuesto, si estos valores son suficientemente buenos depende de los requerimientos del usuario.

5. Aplicabilidad del procedimiento en el ámbito de la ingeniería

Las competencias específicas desarrolladas resultan prometedoras para plantear alternativas de solución a problemas de ingeniería en las distintas áreas. En particular, el estudio de procesos estacionarios y de equilibrio de diferentes fenómenos físicos en medios continuos (mecánicos, eléctricos, caloríficos, ...) frecuentemente da lugar a ecuaciones diferenciales en derivadas parciales de tipo elíptico, cuya solución debe satisfacer condiciones de contorno o frontera. En muchas situaciones el problema se reduce a estudiar los distintos modos normales y es frecuente que uno o más de ellos obedezcan ecuaciones diferenciales del tipo

$$y''(x) + [\beta - g(x)]y(x) = 0, \quad a \leq x \leq b \quad (28)$$

cuyas soluciones deben satisfacer condiciones de contorno de la forma

$$\begin{cases} y(a) = y(b) = 0 \\ y'(a) = y'(b) \end{cases} \quad \text{o} \quad \begin{cases} y(a) = y(b) \\ y'(a) = y'(b) = 0 \end{cases} \quad (29)$$

Si $g(x)$ es una función continua en el intervalo (a, b) y $\beta > 0$ (β es el parámetro de la ecuación), nos encontramos frente a un problema de Sturm-Liouville, es decir, solo existen soluciones no-triviales para determinados valores de β . Es de destacar que en general no se conocen las soluciones analíticas de estas ecuaciones y es habitual recurrir a cálculo computacional o aproximaciones perturbativas. Por otra parte, esta ecuación diferencial es una ecuación tipo-Schrödinger. Luego, si $g(x)$ es una función convexa simétrica que presenta su valor mínimo en $x = \xi$, podemos plantear

$$y_a^\pm(x) = A \exp\left(\pm \frac{1}{2} \int dx \sqrt{(x - \xi) g'(x)}\right) \quad (30)$$

y elegir la apropiada función y constantes de integración de manera que se verifique (29). De esta forma obtendremos la expresión ansatz para el modo fundamental del sistema $y_o^{ansatz}(x)$. Los restantes modos serán dados por

$$y_n^{ansatz}(x) = \alpha_n \left\{ (x - \xi)^n y_o^{ansatz}(x) - \sum_{k=0}^{n-1} \left[\int_a^b (x - \xi)^k (y_k^{ansatz}(x))^2 \right] y_k^{ansatz}(x) \right\} \quad (31)$$

y sus respectivos autovalores

$$\beta_n = \int_a^b \left[\frac{1}{2} x g'(x) + g(x) \right] (y_n^{\text{ansatz}}(x))^2 dx \quad (32)$$

5. Conclusiones

Un tratamiento ansatz para tratar con potenciales convexos simétricos ha sido introducido en la literatura. El procedimiento es elemental. A pesar de la sencillez y el carácter libre de parámetros, el presente procedimiento proporciona resultados en concordancia con aquellos que se encuentran en la literatura. Por supuesto, si estos valores son suficientemente buenos para describir la situación en cuestión, depende de los requerimientos del usuario.

Sin duda, los resultados presentados aquí permitirán que muchos profesionales, no familiarizados con la teoría cuántica, puedan utilizar esta poderosa herramienta para abordar situaciones en las distintas áreas del conocimiento. Estudios de estas características están en progreso y serán reportados en otras publicaciones.

Agradecimiento: Este trabajo fue parcialmente soportado por el Proyecto "Investigación en el área de Ciencias Básicas-Convocatoria 2014-" de la Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Argentina.

References

1. P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (McGraw-Hill, New York, 1953).
2. J.N. Ginocchio, *Ann.Phys.* **152** (1984) 203-219.
3. F. Cooper, J.N. Ginocchio and A. Khare, *Phys.Rev. D* **36** (1987) 2458-2473.
4. G. Avdelas, T.E. Simos, and J. VigoAguiar. *Comput. Phys. Commun.* **131**(2000), 52.
5. G. Avdelas and T.E. Simos. *Phys. Rev. E* **62**, (2000) 1375.
6. J.D. Praeger. *Phys. Rev. A* **63** (2001), 022115.
7. M. Sugawara. *Chem. Phys. Lett.* **295** (1998), 423.
8. H. Nakanishi and M. Sugawara. *Chem. Phys. Lett.* **327** (2000), 429.
9. J.H. Holland, *Adaptation in Natural and Artificial Systems* (Univ. of Michigan Press, Ann Arbor, 1992).
10. U.D. Jentschura, J. Zinn-Justin. *J. Phys. A* **34** (2001), L253-L258.
11. P. Amore. *J. Phys. A* **39** (2006), L349-L355.
12. P. D. Robinson. *Proc. R Soc. A* **283** (1965) 229-237.
13. F. M. Fernandez and E. A. Castro, *Hypervirial theorems* (Springer-Verlag, Berlin, 1987).
14. B. R. Frieden: *Science from Fisher Information* (Cambridge, University Press; Cambridge, 2004) .
15. S. P. Flego, A. Plastino, and A.R. Plastino, *Ann. Phys. (N.Y.)*, **326** (2011) 2533-2543.
16. S. P. Flego, A. Plastino, A. R. Plastino, *Physica A* **390** (2011) 2276-2281.
17. S. P. Flego, A. Plastino, and A. R. Plastino, *Phys. Scr.* **85** (2012) 055002.
18. S.P.Flego: "Ansatz para obtener la Función de Distribución de Probabilidades de Fisher de Potenciales Convexos", en Marcos D. Actis et.al.: Segundas Jornadas de Investigación y Transferencia - 1a ed. - (Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Bs.As., Argentina, 2014), 245-250. ISBN 978-950-34-0946-6.
19. El significado literal de la palabra alemana "ansatz" es algo así como "enfoque", es decir, un ansatz es una cierta forma de abordar el problema mediante la elección de una forma funcional particular. Así, un ansatz es una solución estimada a una ecuación que describe un problema físico o matemático. Podríamos decir que un ansatz es un sabio acierto, legitimado por los resultados obtenidos.
20. Usualmente se utiliza el término "ansatz" cuando se postula una solución en forma paramétrica y se determinan los valores de los parámetros por medio de un proceso de prueba y ajuste para alcanzar y/o mejorar el resultado de la aproximación. Con un "buen ansatz" se puede alcanzar el nivel de precisión deseado. No obstante, si se varían los parámetros naturales del sistema en estudio, es probable que sea necesario realizar un nuevo proceso de prueba y ajuste. El presente ansatz, derivado de inferir una relación local desde una global (TV), no contiene parámetros de ajuste, lo cual se expresa diciendo "libre de parámetros". Los parámetros que intervienen en su expresión son los parámetros naturales del sistema y por lo tanto, responde en forma natural a las variaciones de los mismos.
21. S.P.Flego. *Virial-ansatz treatment for time-independent symmetric convex potential*. To be submitted.
22. W. Greiner and B. Müller, "Quantum mechanics. An Introduction", Springer, Berlin, 1988.
23. C. Niculescu, *Convex Functions and their Applications: A Contemporary Approach*. CMS Books in Mathematics (Springer; 2006 edition, ISBN-10: 0387243003) and ref. cited therein.
24. P. D. Dennery and A. Krzywicki, *Mathematics for Physicists*,(Dover, Nueva York, 1996).